Control 3 MA-33A-1 2006-2

Profesor Dr. Gonzalo Hernandez - Auxiliar Gonzalo Rios

UChile - Departamento de Ingeniería Matemática

1) Ecuaciones No-Lineales:

   En la molécula diatómica de la sal común, cloruro de sodio NaCl, el potencial de interacción entre los iones Na+ y Cl- está dado por:

   $$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + V_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$$

   donde r es la distancia que los separa, q es la carga del protón, ε_0 es la permitividad eléctrica del vacío, y V_0 y r_0 son constantes que dependen de la molécula. Los datos para la molécula NaCl son:

   $$\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} = 14.4\ [\mathring{A}\cdot eV] \qquad V_0 = 1090\ [eV] \qquad r_0 = \ 0.33\ [\mathring{A}]$$

   Para que la molécula esté en equilibrio, la fuerza de interacción entre los iones debe ser cero, y se cumple la siguiente relación entre fuerza y potencial:

   $$f(r) = -\frac{dV(r)}{dr}$$

   Se desea encontrar la distancia entre los iones, cuando la molécula está en equilibrio. Para esto, sigamos los siguientes pasos (Para todo el problema, use una aritmética finita de 4 cifras significativas con redondeo):

   (a) Plantee el sistema no lineal a resolver. Compruebe la existencia de un cero dentro del intervalo $[2,4]$

   (b) Se proponen dos métodos para obtener un punto inicial r_0 para aplicar el método de Newton.

      i) El polinomio normalizado de aproximación por mínimos cuadrádos de $f(r)$ en el intervalo $[2,4]$ es:

      $$p(x) = x^3 - 9.55x^2 + 29.9x - 30.6$$

      Se desea aproximar las raices de $f(r)$ por las raices reales de $p(x)$. Haga 2 iteraciones del método de Graeffe aplicado al polinomio $p(x)$, y de las tres raices obtenidas, quédese con aquella que hace a $f(r)$ más cercano a cero. Llame a este punto inicial r_1.
      Obs: $(x^3+ax^2+bx+c)(-x^3+ax^2-bx+c) = -x^6 + (a^2-2b)x^4 + \left(2ac-b^2\right)x^2 + c^2$

      ii) Haga 2 iteraciones con el método de la Bisección, y luego quédese con el punto medio del intervalo encontrado. Llame a este punto inicial r_2.

   (c) Aplicando el método de Newton

      i) Haga 1 iteración del método de Newton a partir de r_1. Llame a este resultado d_1.

      ii) Haga 1 iteración del método de Newton a partir de r_2. Llame a este resultado d_2

   (d) Determine el número de operaciones para calcular r_1 y r_2. Compare la precisión de las soluciones d_1 y d_2.

2) Modelación en Optimización:

Suponga que una compañía produce un producto para satisfacer una demanda conocida y que la produccción debe ser determinada en T períodos. La producción se puede hacer con fuerza laboral estable o temporal. Las variables del modelo son: cantidad de producto producido (fuerza laboral estable), niveles de inventario y cantidad de fuerza laboral temporal. La función objetivo y restricciones consideran:

i) Función Objetivo: Costo de producción, inventario y de trabajo temporal (Para evitar fluctuaciones el costo es proporcional al cuadrado de la diferencia en la fuerza de trabajo temporal entre dos períodos sucesivos)

ii) Restricciones: Balance de demanda y capacidad máxima de producción b.

Los datos del problema son: nivel de inventario inicial I_0, fuerza de trabajo temporal inicial L_0 y demanda d_k conocida durante el período k. Sea p es el número de unidades producidas por unidad de fuerza de trabajo temporal durante cualquier período.

Determine un modelo matemático que entregue la cantidad de producto producido, nivel de inventario y fuerza de trabajo temporal durante los T períodos, de manera que las restricciones sean satisfechas y el costo total sea minimizado.

3) Integración:

En la Cuadratura de Gauss Chebyshev consideramos el caso de la regla de tres nodos en $[-1,1]$:

$$I(f)=\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\omega_{-1}f(x_{-1})+\omega_0 f(x_0)+\omega_1 f(x_1)$$

Las parámetros x_i y ω_i (6 en total), se eligen de modo que $I(f)$ sea exacta para polinomios de grado $2n-1=5$. Esto genera el siguiente sistema de ecuaciones no lineales:

$$\begin{array}{lll}
f(x)=1\Rightarrow & \omega_{-1}\cdot 1+\omega_0\cdot 1+\omega_1\cdot 1=\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} & =\pi\\
f(x)=x\Rightarrow & \omega_{-1}x_{-1}+\omega_0 x_0+\omega_1 x_1=\int_{-1}^{1}\frac{x\,dx}{\sqrt{1-x^2}} & =0\\
f(x)=x^2\Rightarrow & \omega_{-1}x_{-1}^2+\omega_0 x_0^2+\omega_1 x_1^2=\int_{-1}^{1}\frac{x^2dx}{\sqrt{1-x^2}} & =\dfrac{\pi}{2}\\
f(x)=x^3\Rightarrow & \omega_{-1}x_{-1}^3+\omega_0 x_0^3+\omega_1 x_1^3=\int_{-1}^{1}\frac{x^3dx}{\sqrt{1-x^2}} & =0\\
f(x)=x^4\Rightarrow & \omega_{-1}x_{-1}^4+\omega_0 x_0^4+\omega_1 x_1^4=\int_{-1}^{1}\frac{x^4dx}{\sqrt{1-x^2}} & =\dfrac{3\pi}{8}\\
f(x)=x^5\Rightarrow & \omega_{-1}x_{-1}^5+\omega_0 x_0^5+\omega_1 x_1^5=\int_{-1}^{1}\frac{x^5dx}{\sqrt{1-x^2}} & =0
\end{array}$$

Dada la simetría del problema, es razonable hacer el siguiente Ansatz:

$$x_0=0 \qquad -x_{-1}=x_1=\lambda \qquad \omega_0=\alpha \qquad \omega_{-1}=\omega_1=\beta$$

(a) Demuestre que aplicando el Ansatz, el sistema anterior se reduce a:

$$2\beta+\alpha=\pi \qquad 2\beta\lambda^2=\tfrac{\pi}{2} \qquad 2\beta\lambda^4=\tfrac{3\pi}{8}$$

y obtenga su solución.

(b) Considere $f(x)=\frac{1}{1+x^4}$. Con esto:

$$I(f)=\int_{-1}^{1}f(x)dx=\int_{-1}^{1}\tfrac{1}{1+x^4}dx$$

i) Calcule $I(f)$ mediante Cuadratura de Chebyshev.

ii) Calcule $I(f)$ mediante Simpson Compuesto ($n=6$).

(c) Si el valor exacto es $I(f)=1.733\,946\,0$, compare los métodos de Cuadratura de Chebyshev y Simpson Compuesto, en cuanto a precisión, facilidad de aplicación y cantidad de operaciones.